



PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11) Publication number: **2000065762 A**(43) Date of publication of application: **03 . 03 . 00**

(51) Int. Cl. **G01N 23/04**
G01B 15/00
G06T 1/00
H01J 37/295

(21) Application number: **10250354**(71) Applicant: **NEC CORP**(22) Date of filing: **21 . 08 . 98**(72) Inventor: **IDE TAKASHI**

(54) **METHOD AND APPARATUS FOR
 MEASUREMENT OF CRYSTAL STRAIN AS WELL
 AS STORAGE MEDIUM**

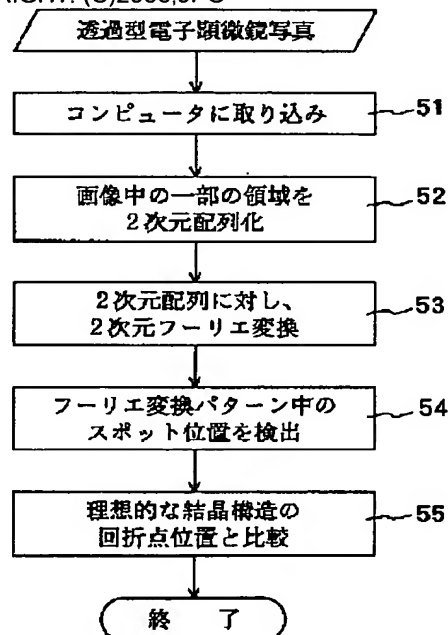
(57) Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a crystal-strain measuring method whose spatial resolution is higher than that of conventional methods such as a micro Raman method or the like and in which a strain and defect in a very small region of a crystal can be investigated.

SOLUTION: The transmission electron microscopic image of a sample is changed into a digital image so as to be fetched into a computer (Step 51). The image is digital-two-dimensional-complex-Fourier-transformed, and a diffraction pattern is found (Step 53). One or a plurality of diffraction spot positions in the diffraction pattern are found (Step 54). The positions are compared with a diffraction point position in the case of an ideal crystal structure (Step 55), and the strain of a crystal lattice is detected. In addition, on the basis of the spot position, the spacing between lattice planes, the direction of the planes or a deformation matrix due to a strain is calculated, and strain information which is easily understood is formed. In addition, this operation is performed in a plurality of regions, a relative change in the strain according to a place is investigated, the amount of the change is

mapped, and the strain is changed into an image.

COPYRIGHT: (C)2000,JPO



(19)日本国特許庁 (J P)

(12) 公 開 特 許 公 報 (A)

(11)特許出願公開番号
特開2000-65762
(P2000-65762A)

(43)公開日 平成12年3月3日(2000.3.3)

(51)Int.Cl. ⁷	識別記号	F I	テーマコード(参考)
G 0 1 N 23/04		G 0 1 N 23/04	2 F 0 6 7
G 0 1 B 15/00		G 0 1 B 15/00	B 2 G 0 0 1
G 0 6 T 1/00		H 0 1 J 37/295	5 B 0 5 7
H 0 1 J 37/295		G 0 6 F 15/62	3 8 0

審査請求 有 請求項の数21 F D (全 21 頁)

(21)出願番号 特願平10-250354

(22)出願日 平成10年8月21日(1998.8.21)

(71)出願人 000004237

日本電気株式会社
東京都港区芝五丁目7番1号

(72)発明者 井手 隆

東京都港区芝五丁目7番1号 日本電気株
式会社内

(74)代理人 100070219

弁理士 若林 忠 (外4名)

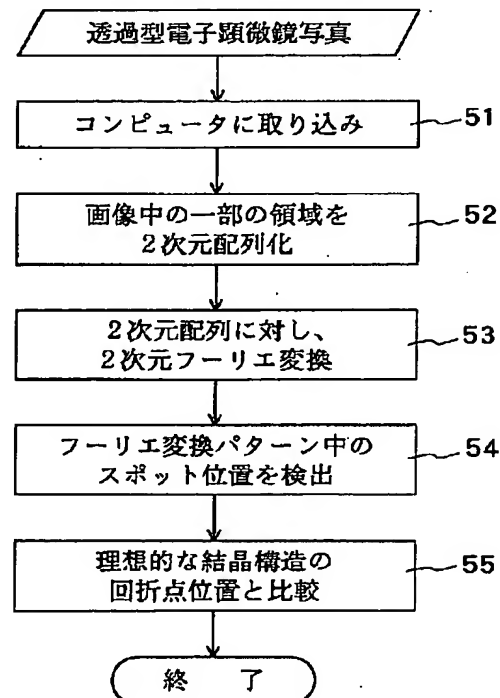
最終頁に続く

(54)【発明の名称】 結晶歪み測定方法、結晶歪み測定装置及び記録媒体

(57)【要約】

【課題】 マイクロラマン法などの従来法よりも空間分解能が高く、結晶の微小な領域での歪みや欠陥を調べることができる結晶歪み測定方法を提供する。

【解決手段】 試料の透過型電子顕微鏡像をデジタル画像化しコンピュータに取り込み(ステップ51)、デジタル2次元複素フーリエ変換をすることによって回折パターンを求め(ステップ53)、その回折パターン中の一つあるいは複数の回折スポット位置を求め(ステップ54)、理想的な結晶構造の場合の回折点位置と比較することで(ステップ55)、結晶格子の歪みを検出する。また、このスポット位置から格子面間隔やその面の方向、あるいは歪みによる変形行列を計算し、理解しやすい歪み情報とする。さらには、複数の領域でこの操作を行い、場所による歪みの相対的な変化を調べたり、これらの量をマッピングすることによって歪みを画像化する。



【特許請求の範囲】

【請求項 1】 試料の透過型電子顕微鏡像から前記試料での結晶に関する情報を取得する結晶歪み測定方法であって、

前記透過型電子顕微鏡像をデジタル画像に変換する工程と、

前記デジタル画像の少なくとも一部の領域に対して 2 次元フーリエ変換を施して当該領域の回折パターンを計算する工程と、を有する結晶歪み測定方法。

【請求項 2】 計算された前記回折パターンにおける回折スポットの位置と理想的な結晶構造での回折点位置との違いから、前記試料中における局所的な格子の歪みを検出する工程をさらに有する、請求項 1 に記載の結晶歪み測定方法。

【請求項 3】 前記透過型電子顕微鏡像内の複数の領域に関してそれぞれ前記回折パターンを計算して前記回折パターンから回折スポットを計算し、前記試料中での場所による相対的な結晶の歪みを検出する、請求項 1 に記載の結晶歪み測定方法。

【請求項 4】 前記透過型電子顕微鏡像内の複数の領域に関してそれぞれ前記回折パターンを計算して前記回折パターンから回折スポットの強度を計算し、その強度の計算結果に基づいて前記試料の結晶情報を分布としてマッピングする、請求項 1 に記載の結晶歪み測定方法。

【請求項 5】 前記透過型電子顕微鏡像内の複数の領域に関してそれぞれ前記回折パターンを計算して回折点位置を求め、各領域の回折点の位置から結晶面間隔を計算し、前記結晶面間隔の分布をマッピングする、請求項 1 に記載の結晶歪み測定方法。

【請求項 6】 回折空間の原点から同一方向あるいは正反対方向にない 2 点の回折スポットについて、前記回折パターンを計算する工程を実施し、前記回折パターン中における前記 2 点の回折スポットの位置と理想的な結晶構造での回折点位置とから変形行列を算出する、請求項 1 に記載の結晶歪み測定方法。

【請求項 7】 前記透過型電子顕微鏡像内の複数の領域に関してそれぞれ前記変形行列を算出し、前記試料中での場所による相対的な結晶の歪みを検出する、請求項 6 に記載の結晶歪み測定方法。

【請求項 8】 検出された前記相対的な結晶の歪みの分布のマッピングを行う、請求項 3 または 7 に記載の結晶歪み測定方法。

【請求項 9】 マッピングされた分布における特徴的な領域に関連付けて、前記透過型電子顕微鏡像の一部を抽出して表示する請求項 4、5 及び 7 のいずれか 1 項に記載の結晶歪み測定方法。

【請求項 10】 試料の透過型電子顕微鏡像から前記試料での結晶に関する情報を取得する結晶歪み測定装置であって、

前記透過型電子顕微鏡像をデジタル画像として取り込む

画像入力手段と、

前記デジタル画像の少なくとも一部の領域に対して 2 次元フーリエ変換を施して当該領域の回折パターンを計算するフーリエ変換手段と、

前記回折パターンに対して計算処理を実行する計算手段と、を有する結晶歪み測定装置。

【請求項 11】 前記計算手段が、前記回折パターン中の回折スポットの位置を算出し、該位置と理想的な結晶構造での回折点位置との違いから、前記試料中における局所的な格子の歪みを検出する、請求項 10 に記載の結晶歪み測定装置。

【請求項 12】 前記フーリエ変換手段が、前記透過型電子顕微鏡像内の複数の領域に対してそれぞれ前記回折パターンを計算し、前記計算手段が、前記各回折パターンにおける回折スポット位置を計算して、前記試料中での場所による相対的な結晶の歪みを検出する、請求項 10 に記載の結晶歪み測定装置。

【請求項 13】 前記フーリエ変換手段が、前記透過型電子顕微鏡像内の複数の領域に対してそれぞれ前記回折パターンを計算し、前記計算手段が、前記各回折パターンにおける回折スポットの強度を計算する、請求項 10 に記載の結晶歪み測定方法。

【請求項 14】 前記フーリエ変換手段が、前記透過型電子顕微鏡像内の複数の領域に対してそれぞれ前記回折パターンを計算し、前記計算手段が、前記各回折パターンから回折点位置を求め、各領域の回折点の位置から結晶面間隔を計算する、請求項 10 に記載の結晶歪み測定装置。

【請求項 15】 回折空間の原点から同一方向あるいは正反対方向にない 2 点の回折スポットについて、前記フーリエ変換手段が前記回折パターンを計算し、前記計算手段が、前記回折パターン中における前記 2 点の回折スポットの位置と理想的な結晶構造での回折点位置とから変形行列を算出する、請求項 10 に記載の結晶歪み測定装置。

【請求項 16】 前記計算手段による計算結果として得られた分布を表示する表示手段をさらに有する請求項 11 乃至 15 いずれか 1 項に記載の結晶歪み測定装置。

【請求項 17】 前記表示手段が、前記分布における特徴的な領域に関連付けて、前記透過型電子顕微鏡像の一部を抽出して表示する請求項 16 に記載の結晶歪み測定装置。

【請求項 18】 試料の透過型電子顕微鏡像がデジタル画像として入力するコンピュータで使用されるプログラムを格納した記録媒体であって、

前記デジタル画像の少なくとも一部の領域に対して 2 次元フーリエ変換を施して当該領域の回折パターンを計算する工程を、前記コンピュータに実行させるプログラムを格納した、コンピュータで読み取り可能な記録媒体。

【請求項 19】 前記プログラムが、

計算された前記回折パターンにおける回折スポットの位置と理想的な結晶構造での回折点位置との違いから、前記試料中における局所的な格子の歪みを検出する工程を、さらに前記コンピュータに実行させるものである、請求項 18 に記載の記録媒体。

【請求項 20】 試料の透過型電子顕微鏡像がデジタル画像として入力するコンピュータで使用されるプログラムを格納した記録媒体であって、前記デジタル画像の少なくとも一部の領域に対して 2 次元フーリエ変換を施すことにより、回折空間の原点から同一方向あるいは正反対方向にない 2 点の回折スポットについて、回折パターンを計算する工程と、前記回折パターン中における前記 2 点の回折スポットの位置と理想的な結晶構造での回折点位置とから変形行列を算出する工程と、を前記コンピュータに実行させるプログラムを格納した、コンピュータで読み取り可能な記録媒体。

【請求項 21】 試料の透過型電子顕微鏡像がデジタル画像として入力するコンピュータで使用されるプログラムを格納した記録媒体であって、前記デジタル画像の少なくとも一部の領域に対して 2 次元フーリエ変換を施すことによって、前記透過型電子顕微鏡像内の複数の領域のそれぞれでの前記回折パターンを計算する工程を前記コンピュータに実施させるとともに、

(i) 前記回折パターンから回折スポットを計算し、前記試料中での場所による相対的な結晶の歪みを検出する工程、(ii) 前記回折パターンから回折スポットの強度を計算し、その強度の計算結果に基づいて前記試料の結晶情報を分布としてマッピングする工程、(iii) 前記回折パターンから回折点位置を求め、各領域の回折点の位置から結晶面間隔を計算し、前記結晶面間隔の分布をマッピングする工程、及び(iv) 回折空間の原点から同一方向あるいは正反対方向にない 2 点の回折スポットについての回折パターンに基づいて変形行列を算出して前記試料中での場所による相対的な結晶の歪みを検出する工程、のうちの少なくとも 1 つの工程を前記コンピュータに実施させるプログラムを格納した、コンピュータで読み取り可能な記録媒体。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】 本発明は結晶評価技術に関し、特に、試料の透過型電子顕微鏡像に基づいてその試料における結晶の歪みや結晶面間隔などの情報あるいはそれらの分布などの情報を求める結晶歪み測定方法及び装置に関する。

【0002】

【従来の技術】 半導体素子の高集積化が進行し、半導体素子サイズがより小さくなってきた。素子サイズが小さくなると、半導体結晶中の微小な領域に働く応力やそれ

に伴う結晶欠陥が問題となる。

【0003】 試料結晶における歪みを調べる従来の手法として、X 線回折法が確立された手法としてある。また、結晶の微小部分の歪みを調べる手法として、マイクロラマン法が知られている。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】 しかしながら、近年の半導体素子の高集積化は著しく、集積化された半導体サイズは、一段と小さくなって、マイクロラマン法などの結晶歪みを調べる従来法での空間分解能以下となっている。その結果、従来法では、集積化された半導体素子の半導体結晶内部の結晶歪みを直接測定することが、不可能となっている。

【0005】 そこで本発明は、結晶の微小な領域での歪みや欠陥、面間隔を検出し、あるいはこれらの分布を調べることができる、結晶歪み検出方法及び装置を提供することを目的とする。

【0006】

【課題を解決するための手段】 本発明の結晶歪み測定方法は、試料の透過型電子顕微鏡像から試料での結晶に関する情報を取得する結晶歪み測定方法であって、透過型電子顕微鏡像をデジタル画像に変換する工程と、デジタル画像の少なくとも一部の領域に対して 2 次元フーリエ変換を施して当該領域の回折パターンを計算する工程と、を有する。

【0007】 本発明の結晶歪み測定装置は、試料の透過型電子顕微鏡像から前記試料での結晶に関する情報を取得する結晶歪み測定装置であって、透過型電子顕微鏡像をデジタル画像として取り込む画像入力手段と、デジタル画像の少なくとも一部の領域に対して 2 次元フーリエ変換を施して当該領域の回折パターンを計算するフーリエ変換手段と、回折パターンに対して計算処理を実行する計算手段と、を有する。

【0008】 すなわち本発明では、透過型電子顕微鏡像をデジタル画像に変換してコンピュータなどに取り込み、デジタル 2 次元フーリエ変換を実行することによって回折パターンを求める。回折パターンを求めてしまえば、その回折パターン中の一つあるいは複数の回折スポット位置を求め、理想的な結晶構造の場合の回折点位置と比較することで、結晶格子の歪みを検出することができる。この歪みは、試料内の各領域で測定することにより、歪みの分布としてマッピングすることができる。

【0009】 また本発明では、回折スポット位置の測定結果から、結晶面の面間隔や面の方向を求めることができる。結晶面の面間隔 d は、その結晶面に相当する回折スポットの位置の波数ゼロに相当する回折点位置からの相対座標をデジタルピクセル座標で (k_x, k_y) として、以下の式から計算することができる。

【0010】

【数 1】

$$d = \frac{a}{\sqrt{(k_x/w_x)^2 + (k_y/w_y)^2}}$$

ここで a は、デジタル化された透過電子顕微鏡画像での各ピクセル（画素）間の実際の距離であり、 w_x と w_y は、それぞれ、デジタル 2 次元フーリエ変換での x 方向と y 方向のデータ数である。また、結晶面の方向は、 $k_x \neq 0$ ならば x 軸からなす角度を 90 度分法で $\tan^{-1}(k_y/k_x) - 90^\circ$ から計算することができ、 $k_x = 0$ ならば y 軸と平行である。

【0011】また、異なる 2 つの回折スポット位置および理想的結晶構造から、歪みによる変形行列を求めることもできる。この変形行列は、2 つの回折スポットの位置の波数ゼロに相当する回折点位置からの相対座標をそれぞれデジタルピクセル座標で (k_{1x}, k_{1y}) 及び (k_{2x}, k_{2y}) とし、理想的な結晶構造の場合のこれらの回折点に相当する回折点座標をそれぞれ (k_{1x}^0, k_{1y}^0) 及び (k_{2x}^0, k_{2y}^0) とすると、

【0012】

【数 2】

$$\begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yx} & 1 + \varepsilon_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_{1x}^0 & k_{1y}^0 \\ k_{2x}^0 & k_{2y}^0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} k_{1x} & k_{1y} \\ k_{2x} & k_{2y} \end{pmatrix}$$

の式で計算できる。ここで、行列の左肩の t は転置行列を意味し、右肩の -1 は逆行列を意味している。

【0013】上述した本発明の結晶歪み測定方法による解析は、一般には、透過型電子顕微鏡像をデジタル画像（典型的には、8 ビット（256 階調）白黒画像データ）として取り込んだコンピュータによって行われる。そして、これらの解析の精度は、デジタル画像データとして取り込んだ透過電子顕微鏡画像の倍率の精度に大きく依存する。そこで、同一の透過電子顕微鏡視野内の複数の領域についてこれらの解析を行い相対的にそれらの結果を比較することが考えられ、このような手法を採用することにより、電子顕微鏡画像の精度以下の微小な歪みを場所による相対的な変化として調べることができ

る。

【0014】さらに、複数の領域でこれらの操作を行い、その結果をマッピングすることで、歪みを画像化することが可能である。また、この画像情報とそれらの領域の座標を合わせて記録し、その画像から調べたい位置を指示することで、領域の座標情報からその領域に対応する元の電子顕微鏡画像の一部を取り出して、その場所の格子像を表示することも出来る。また、複数の領域で回折スポットの強度を求め、その結果をマッピングすることで、結晶性に代表される結晶情報を画像化することも可能である。

【0015】本発明では、透過型電子顕微鏡像を用い、これに対して 2 次元フーリエ変換を実行するので、1 回の 2 次元フーリエ変換の対象となる領域を狭くすること

で、測定の空間分解能を高めることが可能である。

【0016】

【発明の実施の形態】次に、本発明の好ましい実施の形態について、図面を参照して説明する。

【0017】図 1 は、本発明の好ましい実施の形態の結晶歪み測定装置の構成を示すブロック図である。この結晶歪み測定装置は、試料の透過型電子顕微鏡像（電子顕微鏡写真）を取り込んでデジタル画像として出力する画像読み取り部 11 と、画像読み取り部 11 で取得したデジタル画像を蓄積するとともに、計算された回折パターンなどを一時的に蓄積し、また、理想的な結晶構造での回折点位置などのデータを格納する記憶部 12 と、デジタル画像中の一部の領域（例えば横 256 ドット×縦 256 ドットの大きさの領域）に対して 2 次元フーリエ変換を行って回折パターンを求める 2 次元フーリエ変換処理部 13 と、計算された回折パターンに基づいて各種の計算処理を実行する計算処理部 14 と、計算処理部 14 での計算結果に基づく表示を行う表示部 15 と、から構成されている。画像読み取り部 11 は、画像入力手段に対応し、典型的には、イメージスキャナによって構成されている。2 次元フーリエ変換処理部 13 は、フーリエ変換手段に対応する。

【0018】計算処理部 14 は、計算手段に対応するものであって、例えば、(i) 得られた回折パターン中の回折スポット位置を算出し、その位置と理想的な結晶構造での回折点位置との違いから、試料における局所的な格子の歪みを検出する、(ii) 電子顕微鏡像での複数の領域における回折パターンから回折スポット位置を計算し、試料中での場所による相対的な結晶の歪みを検出する、(iii) 回折パターンから回折スポット強度を算出する、(iv) 電子顕微鏡像での複数の領域における回折スポット強度から、試料の結晶情報を求める、(v) 電子顕微鏡像での複数の領域における回折パターンから回折点位置を求め、各領域の回折点の位置から結晶面間隔を計算する、(vi) 回折空間の原点から同一方向あるいは正反対方向にない 2 点の回折スポットについて、計算された回折パターン中におけるその 2 点の回折スポットの位置と理想的な結晶構造での回折点位置とから変形行列を算出する、(vii) 電子顕微鏡像での複数の領域における変形行列から、試料中での場所による相対的な結晶の歪みを検出する、(viii) ここで述べた各計算処理によって得られた結果を分布としてマッピングする、などの計算処理を実行するものである。

【0019】表示部 15 は、表示手段に対応するものであって、例えば CRT などによって構成されている。さらに表示部 15 は、重ね合わせ表示などの表示手法により、記憶部 12 内に格納されている透過型電子顕微鏡像のデジタル画像の一部を抽出して、計算処理部 14 での計算結果（マッピング結果）と関連付けて表示する機能を有している。

【0020】この実施の形態の結晶歪み測定装置は、一般には、コンピュータシステムとして構成される。

【0021】次に、この結晶歪み測定装置を用いた結晶歪み評価手順の一例について、図2のフローチャートを用いて説明する。

【0022】試料の透過型電子顕微鏡写真が与えられたとして、まず、結晶歪み測定装置を構成するコンピュータにその写真を取り込み（ステップ51）、デジタル画像データとして記憶部12内に蓄積する。写真の取り込みは、具体的には、画像読み取り部11によって行われる。次に、デジタル画像中から、評価の対象とする領域であって、フーリエ変換に適した画素数の領域を抽出し、2次元配列として扱う（ステップ52）。そして、2次元フーリエ変換処理部13によって、この2次元配列に対して2次元フーリエ変換を実施し（ステップ53）、回折パターンを得る。2次元フーリエ変換の際、2次元ガウス分布関数（2次元ガウシアン分布関数）などの窓関数を使用するものとする。

【0023】回折パターンを求めたあとの処理は、後述する実施例に示すように多様であるが、例えば、フーリエ変換パターンすなわち回折パターン中のスポット位置を検出し（ステップ54）、理想的な結晶構造の回折点位置と比較して（ステップ55）、試料における結晶の歪みを検出する。理想的な結晶構造の回折点位置は、予め、実測によって求めておいたり、結晶学的パラメータから計算によって求めておけばよい。

【0024】次に、実施例によって本発明をさらに詳しく説明する。以下の各実施例では、Si(100)基板の表面上にGeを島状にエピタキシャル成長させたものを試料として用いた。図3は、この試料の断面を観察した透過型電子顕微鏡写真である。

【0025】（実施例1）図3に概要を示す試料の倍率100万倍の透過電子顕微鏡断面観察写真（幅20.5cm×高さ14.5cm）をイメージスキャナ装置を用いて200dpi（1インチ（=25.4mm）当り200ドット）の精度でコンピュータに取り込み、その画像の中から、目的とする部分を中心とした横256ドット×縦256ドットの正方形領域を取り出し、その各ドット（画素）の明るさを値とする2次元配列 a_{ij} （ i と j はそれぞれ1～256の整数）を構成した。

【0026】この他に、2次元ガウシアン分布の配列 b_{ij} （ i と j はそれぞれ1～256の整数）を

$$b_{ij} = \exp \{-0.0004((i-129)^2 + (j-129)^2)\}$$
 の式から計算し、この配列と画像配列の各要素同士を掛け合わせて配列 c_{ij} （ i と j はそれぞれ1～256の整数）：

$$c_{ij} = a_{ij} \times b_{ij}$$

を計算した。この配列 c_{ij} を2次元複素高速フーリエ変換法を用いてフーリエ変換し、そのフーリエ変換された

複素数配列 d_{ij} を計算した。

【0027】フーリエ変換に際しては、 $(i, j) = (1, 1)$ が波数ゼロのフーリエ成分となるよう配列 d_{ij} が定まるようにした。その後、配列 d_{ij} の各要素の絶対値を計算し、その波数ゼロのフーリエ成分に相当する要素が配列の中心位置に来るように全要素を並び替えて回折パターン配列 e_{ij} とした。つまり、 i が1から128までの範囲で、かつ j が1から128までの範囲の要素に対しては、

$$e_{ij} = |d_{(i+128)(j+128)}|$$

とし、 i が1から128までの範囲で、かつ j が129から256までの範囲の要素に対しては、

$$e_{ij} = |d_{(i+128)(j-128)}|$$

とし、 i が129から256までの範囲で、かつ j が1から128までの範囲の要素に対しては、

$$e_{ij} = |d_{(i-128)(j+128)}|$$

とし、 i が129から256までの範囲で、かつ j が129から256までの範囲の要素に対しては、

$$e_{ij} = |d_{(i-128)(j-128)}|$$

の計算を行い、配列 e_{ij} の全要素を求めた。図4は、このようにして得られた回折パターンを示している。

【0028】回折パターン配列の極大値の座標を探すことで、回折点の座標を求めた。この回折点の座標とその結晶の理想的な格子定数から計算される位置との違いがその目的の場所の格子歪みを調べた。ここで、求めた極大値の座標から中心座標 $(i, j) = (129, 129)$ までの距離が理想的な結晶の格子定数から求めた値より大きい場合は、格子が理想的な結晶状態より縮み、逆に小さい場合は、格子が理想的な結晶状態より伸びていることを表わしている。Geがエピタキシャル成長した部分では、この解析の結果、回折点が、シリコン結晶で期待される位置よりも4%程度内側に動いていた。このことからGeの部分は、格子が本来のGeの格子に近づいていることが分かった。

【0029】（実施例2）実施例1のような解析を行うためには、電子顕微鏡の拡大倍率が精度よく校正されている必要がある。しかし、この校正精度には限度がある。さらに微細な歪みに関しては、同じ電子顕微鏡写真内の基準となる位置との比較による相対的な歪みを調べることで、相対的測定が可能である。

【0030】図3に概要を示す試料の倍率250万倍の透過電子顕微鏡断面観察写真（幅20.5cm×高さ14.5cm）をイメージスキャナ装置を用いて200dpiの精度でコンピュータに取り込み、その画像の中から2つの領域について目的とした部分を中心とした横256ドット×縦256ドットの正方形領域を取り出し、その各ドットの明るさを値とする2次元配列 a_{ij} （ i と j はそれぞれ1～256の整数）をそれぞれ構成した。

【0031】実施例1の場合と同じ2次元ガウシアン分布の配列 b_{ij} を用い、実施例1と同様に、配列 c_{ij} を

10

20

30

40

50

$$c_{ij} = a_{ij} \times b_{ij}$$

にしたがってそれぞれの領域の配列について計算し、それぞれの領域についてこの配列 c_{ij} を 2 次元複素高速フーリエ変換法を用いてフーリエ変換し、複素数配列 d_{ij} を計算した。フーリエ変換に際しては、 $(i, j) = (1, 1)$ が波数ゼロのフーリエ成分となるよう配列 d_{ij} が定まるようにした。その後、実施例 1 と同様に、配列 d_{ij} の各要素の絶対値を計算し、その波数ゼロのフーリエ成分に相当する要素が配列の中心位置に来るように全要素を並び替えて回折パターン配列 e_{ij} とした。

【0032】図 5 及び図 6 は、このようにして得られた回折パターンを示している。図 5 は、試料の Si 基板部分のうち島状の Ge の下方約 10 nm の領域から得られた回折パターン（2 次元デジタルフーリエ変換パターン）であり、図 6 は、試料の島状の Ge のうちの一部分の領域から得られた回折パターン（2 次元デジタルフーリエ変換パターン）である。

【0033】それぞれの領域について回折パターン配列の極大値の座標を探すことで、回折点の座標を求めた。それぞれの領域について求めたこの回折点の座標の違いからそれぞれの場所の相対的な格子歪み調べた。ここで、求めた極大値の座標から中心座標 $(i, j) = (129, 129)$ までの距離が大きい場合、一方の領域が他方の領域より格子が縮んでいることを表わしている。Ge の部分を複数の領域で調べ比較したところ、場所によりスポット位置が変化することが分かった。この結果は、Ge 膜の中に局所的な小さな歪みが存在することを意味している。

【0034】（実施例 3）実施例 2 のように複数の領域で歪みを比較する場合、電子顕微鏡写真の全領域あるいは目的の領域内で等間隔に複数の領域を選び、その各領域で歪みを求め、その結果を画像化して可視化すると、歪みに関する理解がさらに深まる。

【0035】図 3 に概要を示す試料の倍率 250 万倍の透過電子顕微鏡断面観察写真（幅 20.5 cm × 高さ 14.5 cm）をイメージスキャナ装置を用いて 200 dpi の精度でコンピュータに取り込み、その画像を横 256 ドット × 縦 256 ドットの正方形領域に分割し、その各領域でその領域内の各ドットの明るさを値とする 2 次元配列 a_{ij} （ i と j はそれぞれ 1 ~ 256 の整数）をそれぞれ構成した。

【0036】実施例 1 の場合と同じ 2 次元ガウシアン分布の配列 b_{ij} を使い、実施例 1 と同様に、配列 c_{ij} を

$$c_{ij} = a_{ij} \times b_{ij}$$

にしたがってそれぞれの領域の配列について計算し、それぞれの領域についてこの配列 c_{ij} を 2 次元複素高速フーリエ変換法を用いてフーリエ変換し、複素数配列 d_{ij} を計算した。フーリエ変換に際しては、 $(i, j) = (1, 1)$ が波数ゼロのフーリエ成分となるよう配列 d_{ij} が定まるようにした。その後、実施例 1 と同様に、配列 d_{ij}

の各要素の絶対値を計算し、その波数ゼロのフーリエ成分に相当する要素が配列の中心位置に来るように全要素を並び替えて回折パターン配列 e_{ij} とした。

【0037】それぞれの領域について回折パターン配列の極大値の座標を探すことで、回折点の座標を求める。それぞれの領域について求めた $(1, 1)$ 回折点の x 座標および y 座標をマッピングして画像化した結果が、それぞれ、図 7 と図 8 である。このマッピングでは、明るい部分が回折点を中心より遠く、逆に暗い部分が回折点を中心に近いことを表わしている。この結果から、Ge 膜中の歪み分布が分かった。

【0038】（実施例 4）結晶が極度に歪んでいる場所には、しばしば欠陥が導入されその部分だけ結晶性が悪化する。このような結晶性を調べる場合、回折点のスポット位置より強度をマッピングした方が分かりやすい場合がある。

【0039】図 2 に概要を示す試料の倍率 250 万倍の透過電子顕微鏡断面観察写真（幅 20.5 cm × 高さ 14.5 cm）をイメージスキャナ装置を用いて 200 dpi の精度でコンピュータに取り込み、その画像を横 256 ドット × 縦 256 ドットの正方形領域に分割し、その各領域でその領域内の各ドットの明るさを値とする 2 次元配列 a_{ij} を求めた。

【0040】実施例 1 の場合と同じ 2 次元ガウシアン分布の配列 b_{ij} を使い、実施例 1 と同様に、配列 c_{ij} を

$$c_{ij} = a_{ij} \times b_{ij}$$

にしたがってそれぞれの領域の配列について計算し、それぞれの領域についてこの配列 c_{ij} を 2 次元複素高速フーリエ変換法を用いてフーリエ変換し、複素数配列 d_{ij} を計算した。フーリエ変換に際しては、 $(i, j) = (1, 1)$ が波数ゼロのフーリエ成分となるよう配列 d_{ij} が定まるようにした。その後、実施例 1 と同様に、配列 d_{ij} の各要素の絶対値を計算し、その波数ゼロのフーリエ成分に相当する要素が配列の中心位置に来るように全要素を並び替えて回折パターン配列 e_{ij} とした。

【0041】それぞれの領域について回折パターン配列の極大値の座標を探すことで、回折点の座標を求めた。それぞれの領域について求めた $(1, 1)$ 回折点の強度をマッピングして画像化した結果が、図 9 である。このマッピングでは、明るい部分が回折点強度が大きく、逆に暗い部分が回折点強度が小さいことを表わしている。この結果から、試料での Si 基板と Ge との界面には、転位や点欠陥などの欠陥が導入されていないと考えられる。

【0042】（実施例 5）回折パターン中のスポット位置の変位から結晶面の面間隔や面の方位を求めた方が、より歪みの様子を理解しやすい。ここでは、実施例 3 で求めた複数領域の回折スポット位置から、その回折スポットに対応する結晶面の面間隔および面の方向を求め、マッピングした。

【0043】X線や電子線の回折パターン中の回折点は、結晶面による反射・干渉により生じる。フーリエ変換により計算した回折パターンにおいても、X線や電子線などの波動による回折パターンと同等なパターンが得られるため、その回折点の位置から結晶面に関する情報を求めることができる。結晶面の面間隔は、回折パターンの原点からその結晶面に相当する回折点までの距離に反比例する。このため、回折パターンの原点からその結晶面に相当する回折点までの距離の逆数を計算することで、複数領域の面間隔の変化を相対的に調べることができる。一方、結晶面については、回折パターンの原点からその結晶面に相当する回折点に向かう方向が、その結晶面の法線に相当するという関係がある。このため、回折点の座標を (k_x, k_y) と表わしたとき、 $k_x \neq 0$ ならば $\tan^{-1}(k_y/k_x) - 90^\circ$ がその回折点に相当する結晶面のx軸方向からなす角度に相当し、 $k_x = 0$ ならばその回折点に相当する結晶面はy軸に平行である。

【0044】図3に示す電子顕微鏡写真でこの計算を行い、(111)結晶面の面間隔とその面の方向をマッピングした結果が、それぞれ、図10と図11である。SiとGeの部分で面間隔が変化し、さらに面の方向は、Geの島の内部で変化している様子がわかる。

【0045】(実施例6)回折パターン中のスポット位置の変位を結晶の変形行列要素として表わした方が、通常より、歪みの様子を理解しやすい。ここでは実施例1で求めた回折スポット変位から、試料基板表面における水平方向と垂直方向の変形を行列表現として求めた。図12は、結晶格子の変形によるx軸方向ベクトル、y軸方向ベクトルの変化を説明する図である。

【0046】変形行列は、以下の操作で求めることができる。まず、2つの(111)スポットの回折点位置 (k_{1x}, k_{1y}) と (k_{2x}, k_{2y}) から、実空間の格子ベクトル (r_{1x}, r_{1y}) と (r_{2x}, r_{2y}) を次の式で求める。

【0047】

【数3】

$$\begin{aligned} r_{1x} &= \frac{k_{2y}}{k_{1x}k_{2y} - k_{1y}k_{2x}}, & r_{1y} &= -\frac{k_{2x}}{k_{1x}k_{2y} - k_{1y}k_{2x}} \\ r_{2x} &= -\frac{k_{1y}}{k_{1x}k_{2y} - k_{1y}k_{2x}}, & r_{2y} &= \frac{k_{1x}}{k_{1x}k_{2y} - k_{1y}k_{2x}} \end{aligned}$$

この格子ベクトルと、理想的な結晶構造の格子ベクトル (r_{1x}^0, r_{1y}^0) と (r_{2x}^0, r_{2y}^0) とから、変形行列は、以下の式で求められる。

【0048】

【数4】

$$\begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yx} & 1 + \varepsilon_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{1x}^0 & r_{1y}^0 \\ r_{2x}^0 & r_{2y}^0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} r_{1x} & r_{1y} \\ r_{2x} & r_{2y} \end{pmatrix}$$

ここで求められた変形行列は、

【0049】

【数5】

$$\begin{aligned} \vec{x}' &= (1 + \varepsilon_{xx})\vec{x} + \varepsilon_{xy}\vec{y} \\ \vec{y}' &= \varepsilon_{yx}\vec{x} + (1 + \varepsilon_{yy})\vec{y} \end{aligned}$$

であり、試料基板表面に対して水平方向の単位ベクトル【0050】

【外1】

\vec{x}

と垂直方向の単位ベクトル

【0051】

【外2】

\vec{y}

がそれぞれ

【0052】

【外3】

\vec{x} 及び \vec{y}

方向に、 ε_{xx} 、 ε_{xy} 、 ε_{yx} 、 ε_{yy} だけ変形したことを表わす行列である。

【0053】さらにこの操作を複数の領域に対して行い、変形の違いを比較することも容易に可能である。

【0054】(実施例7)電子顕微鏡写真の全領域を分割しそれぞれの領域で実施例6の操作を行い、結晶の変形の様子をマッピングすることも可能であり、画像化された非常に有益な情報を与える。

【0055】図3に示した電子顕微鏡写真をマッピングした結果が、図13～図16である。Siの部分に比べ、Geの島では格子が広がっているが、 ε_{xx} 成分と ε_{yy} 成分のマッピング結果を見ると、その変化の仕方がx方向とy方向で異なっている。また、 ε_{xy} 及び ε_{yx} 成分のマッピング結果が島内部の左右で変化していることは、島の内部で格子が湾曲していることを示している。

【0056】(実施例8)回折スポットの位置やスポットの強度あるいは結晶面の面間隔や面の方向あるいは結晶格子の変形行列要素のマッピングで特異な点が見つかった場合、その部分だけを電子顕微鏡写真から取り出し、その格子像を調べることは、歪み発生の原因などを調べる上で有用である。このような処理は、マッピング結果を示す画像上での任意の点に相当する電子顕微鏡写真の一部を取り出すことにより、可能である。

【0057】実施例3と同様にして回折スポットの位置をコンピュータで計算し、その計算結果を電子顕微鏡画像中でのその領域の座標と合わせて、ファイルに記録した。このように記録したファイルから、回折スポットの位置の変位をマッピングして画像化し表示する。コンピュータに備え付けられたマウスなどのポインティングデバイスを用いて観察者がその表示画面の中で場所を指定することにより、その指定された回折スポット位置のマッピングデータに対応する電子顕微鏡画像中でのその領域の座標を取り出され、その座標から、元の電子顕微鏡画像から相当する部分の領域の画像だけを取り出される

ようにすることができる。

【0058】図17は、図7に示す回折スポット位置のマッピング結果における異常部を矢印で示したものである。透過型電子顕微鏡像から、この矢印で示す島の外側に隣接した基板部に対応する領域を抽出し、抽出した部分を拡大したものが図18である。この部分は、回折スポット位置をマッピングした画像で見るとスポット位置に異常が見られるが、この部分の格子像を取り出して見る限り、欠陥などの異常な部分は確認できない。

【0059】（実施例9）回折スポットの位置だけではなくスポットの強度についても、実施例8と同様の処理を行うことが可能である。

【0060】実施例4と同様にして、回折スポットの強度を計算し、その計算結果を電子顕微鏡画像中でのその領域の座標と合わせて、ファイルに記録した。このように記録したファイルから、回折スポットの強度の変位をマッピングして画像化し表示する。ポインティングデバイスを用いて観察者がその表示画像中で場所を指定した場合に、その指定された回折スポット強度のマッピングデータに対応する電子顕微鏡画像中のその領域の座標を取り出され、その座標から、元の電子顕微鏡画像から相当する部分の領域の画像だけが取り出された。

【0061】図19は、図9に示す回折スポット強度のマッピング結果における異常部を矢印で示したものである。この矢印で示す基板部に対応する領域を透過型電子顕微鏡像から抽出し、抽出した部分を拡大したものが図20である。この部分では、回折スポット強度をマッピングした画像で見ると、上部と下部でコントラストの違いが顕著に見られるが、この部分の格子像を取り出して見た結果、このコントラストの違いは、格子像の見え方がこの部分で大きく変化したことが原因であることが分かる。これは、薄片化した電子顕微鏡試料の試料厚さが変化して、この部分で格子像の見え方が変化したためと考えられる。

【0062】（実施例10）結晶面の面間隔や面の方向をマッピングし、実施例8や実施例9と同様に電子顕微鏡像と関連付けて表示することが可能である。

【0063】実施例4と同様にして、結晶面の面間隔および面の方向をコンピュータで計算し、その計算結果を電子顕微鏡画像中でのその領域の座標と合わせて、ファイルに記録した。このように記録したファイルから、結晶面の面間隔および面の方向をマッピングして画像化し表示する。ポインティングデバイスを用いて観察者がそれらの2種類の表示画面の中から場所を指定した場合には、その指定された結晶面の面間隔あるいは面の方向をマッピングしたデータに対応する電子顕微鏡画像中のその領域の座標が取り出され、その座標から、元の電子顕微鏡画像から相当する部分の領域の画像だけを取出された。

【0064】図21は、図10に示す結晶の面間隔のマ

ッピング結果において、Ge部分での面間隔の異常部を矢印で示したものである。この矢印で示す島の隅の部分に対応する領域を透過型電子顕微鏡像から取り出し、その取り出された部分を拡大したものが図22である。この部分では、面間隔をマッピングした画像で見ると面間隔が顕著に短くなっていることが分かるが、この部分の格子像を取り出して見る限り、欠陥などの異常な部分は確認できない。

【0065】（実施例11）結晶格子の変形行列要素についても、実施例8～10と同様の処理を行うことが可能である。

【0066】実施例7と同様にして、結晶格子の変形行列要素を計算し、その計算結果を電子顕微鏡画像中でのその領域の座標と合わせて、ファイルに記録した。このようにして記録したファイルから、結晶格子の変形行列要素をマッピングして画像化し表示する。ポインティングデバイスを用いて観察者がその表示画像中で場所を指定すると、その指定された結晶格子の変形行列要素のマッピングデータに対応する電子顕微鏡画像中のその領域の座標が取り出され、その座標から、元の電子顕微鏡画像から相当する部分の領域の画像だけが取り出された。

【0067】図23は、図16に示す結晶格子の変形行列要素 ϵ_{ij} 成分をマッピングした結果において、この変形行列要素 ϵ_{ij} が急峻に変化している部分を矢印で示した図である。この矢印で示す島と基板部との界面部分に対応する領域を透過型電子顕微鏡像から取り出し、その取り出された部分を拡大したものが図24である。この部分では、結晶格子の変形行列要素 ϵ_{ij} をマッピングした画像で見ると、上下方向で急峻な変化が見られるが、この部分の格子像を取り出して見る限り、SiとGeの元素の違いによる像の明るさの変化は見られるが、格子は、Si基板部分からGeの島状部分へ全て連続して繋がっていて、欠陥などの異常な部分は確認できない。

【0068】以上の各実施例で説明した結果を検討すると、図3に電子顕微鏡写真を示す試料では、SiとGeとの界面付近には転位や点欠陥は存在せず、弾性的に格子が歪んでいる、と判断できる。

【0069】以上説明した結晶歪み測定装置は、それを実現するための計算機プログラムを、スーパーコンピュータやワークステーション（WS）、パーソナルコンピュータ（PC）などの計算機に読み込ませ、そのプログラムを実行させることによって実現できる。結晶歪み測定を行うためのプログラムは、磁気テープやCD-ROMなどの記録媒体によって、計算機に読み込まれる。図25は、上述の結晶歪み測定を実行する計算機の構成を示すブロック図である。

【0070】この計算機は、中央処理装置（CPU）21と、プログラムやデータを格納するためのハードディスク装置22と、主メモリ23と、キーボードやマウスなどの入力装置24と、CRTなどの表示装置25と、

磁気テープやCD-ROM等の記録媒体27を読み取る読み取り装置26と、透過型電子顕微鏡写真を読み取ってデジタル画像データに変換するイメージスキャナ28と、から構成されている。ハードディスク装置22、主メモリ23、入力装置24、表示装置25、読み取り装置26及びイメージスキャナ28は、いずれも中央処理装置21に接続している。この計算機では、結晶歪み測定を行うためのプログラムを格納した記録媒体27を読み取り装置26に装着し、記録媒体27からプログラムを読み出してハードディスク装置22に格納し、ハードディスク装置22に格納されたプログラムを中央処理装置21が実行することにより、結晶歪み測定が実行される。

【0071】特に、回折パターンを求めたあとの計算処理は、上述の実施例1～11に示すように多様であるから、プログラムとしては、利用者がコンピュータに入力するコマンドに応じ、(i)回折パターンから回折スポットを計算し、試料中での場所による相対的な結晶の歪みを検出する処理、(ii)回折パターンから回折スポットの強度を計算し、その強度の計算結果に基づいて試料の結晶情報を分布としてマッピングする処理、(iii)回折パターンから回折点位置を求め、各領域の回折点の位置から結晶面間隔を計算し、結晶面間隔の分布をマッピングする処理、及び(iv)回折空間の原点から同一方向あるいは正反対方向にない2点の回折スポットについての回折パターンに基づいて変形行列を算出して試料中での場所による相対的な結晶の歪みを検出する処理、などの処理を選択的に実行するようなもので好ましい。

【0072】

【発明の効果】以上説明したように本発明は、透過型電子顕微鏡像をデジタル画像化してコンピュータに取り込み、2次元フーリエ変換をすることによって回折パターンを形成し、その回折パターン中の回折スポット位置やスポット強度を求め、理想的な結晶構造の場合の回折点位置と比較したり、複数の領域でスポットの位置や強度あるいはスポット位置から計算される結晶面の面間隔や面の方向あるいは結晶格子の変形行列を計算し、相対的に比較することにより、従来法では空間分解能が不足して観測することができなかった、結晶中の微小な領域の格子歪みや結晶性を調べることができるという効果がある。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の好ましい実施の形態の結晶歪み測定装置の構成を示すブロック図である。

【図2】本発明の好ましい実施の形態における処理手順の一例を示すフローチャートである。

【図3】Si(100)表面上にGeをエピタキシャル成長させた試料の断面を示す図面代用の透過電子顕微鏡写真である。

【図4】図3での図示下方中央付近の領域から得られた

2次元デジタルフーリエ変換パターンを示す図である。

【図5】図3でのSi基板部分のうち島状のGeの下方向約10nmの領域から得られた2次元デジタルフーリエ変換パターンを示す図である。

【図6】図3での島状のGeのうちの一部分の領域から得られた2次元デジタルフーリエ変換パターンを示す図である。

【図7】2次元デジタルフーリエ変換パターン中のスポット位置 k_x のマッピング結果を示す図である。

【図8】2次元デジタルフーリエ変換パターン中のスポット位置 k_y のマッピング結果を示す図である。

【図9】2次元デジタルフーリエ変換パターン中のスポット強度のマッピング結果を示す図である。

【図10】2次元デジタルフーリエ変換パターン中から(111)面間隔を計算しマッピングした結果を示す図である。

【図11】2次元デジタルフーリエ変換パターン中から(111)面の方向を計算しマッピングした結果を示す図である。

【図12】結晶格子の変形によるx軸とy軸のベクトルの変化を示す図である。

【図13】2次元デジタルフーリエ変換パターン中から変形行列要素を算出し、その ϵ_{xx} 成分をマッピングした結果を示す図である。

【図14】2次元デジタルフーリエ変換パターン中から変形行列要素を算出し、その ϵ_{yy} 成分をマッピングした結果を示す図である。

【図15】2次元デジタルフーリエ変換パターン中から変形行列要素を算出し、その ϵ_{xy} 成分をマッピングした結果を示す図である。

【図16】2次元デジタルフーリエ変換パターン中から変形行列要素を算出し、その ϵ_{xx} 成分をマッピングした結果を示す図である。

【図17】図7に示すマッピング結果において、Si基板表面部の異常部を矢印で示した図である。

【図18】図17において矢印で示された部分の透過型電子顕微鏡による図面代用の格子像写真である。

【図19】図9に示すマッピング結果において、Si基板部の異常部を矢印で示した図である。

【図20】図19において矢印で示された部分の透過型電子顕微鏡による図面代用の格子像写真である。

【図21】図10に示すマッピング結果において、島状のGe部分での面間隔の異常部を矢印で示した図である。

【図22】図21において矢印で示された部分の透過型電子顕微鏡による図面代用の格子像写真である。

【図23】図16に示すマッピング結果において、格子の変形行列要素 ϵ_{xx} が急峻に変化している部分を矢印で示した図である。

【図24】図22において矢印で示された部分の透過型

17

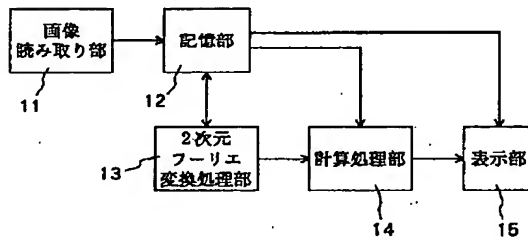
電子顕微鏡による図面代用の格子像写真である。

【図 25】本発明の結晶歪み測定方法の実施に使用されるコンピュータシステムの構成を示すブロック図である。

【符号の説明】

- 11 画像読み取り部
- 12 記憶部
- 13 2次元フーリエ変換処理部
- 14 計算処理部
- 15 表示部

【図 1】

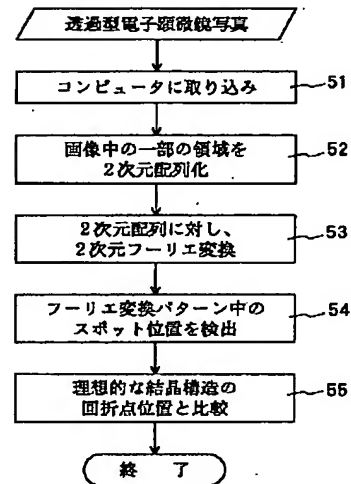


18

- * 21 中央処理装置 (CPU)
- 22 ハードディスク装置
- 23 主メモリ
- 24 入力装置
- 25 表示装置
- 26 読み取り装置
- 27 記録媒体
- 28 イメージスキャナ
- 51~55 ステップ

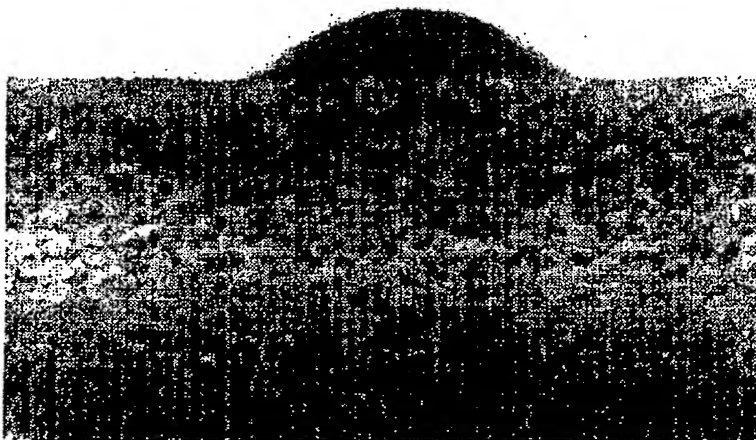
* 10

【図 2】

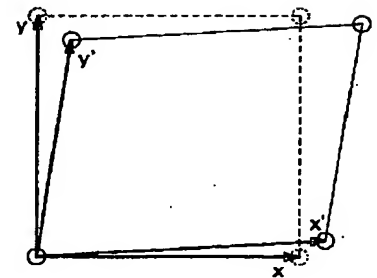


【図 3】

図面代用写真



【図 12】



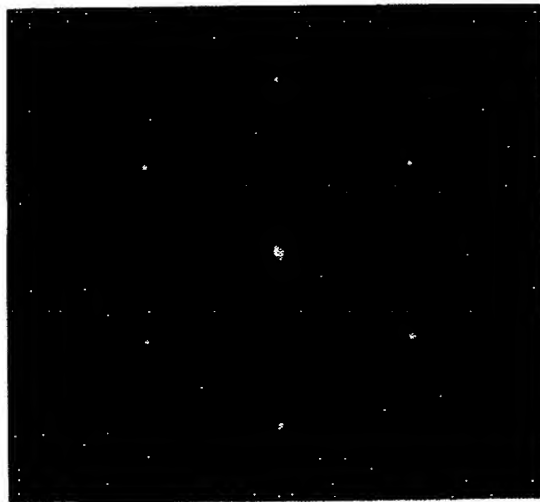
【図4】

図面代用写真



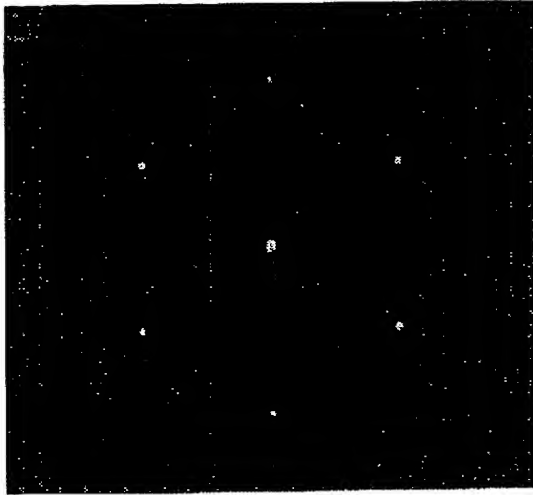
【図5】

図面代用写真

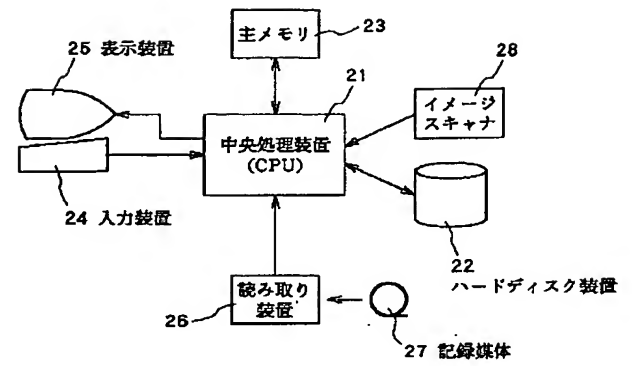


【図6】

図面代用写真



【図25】



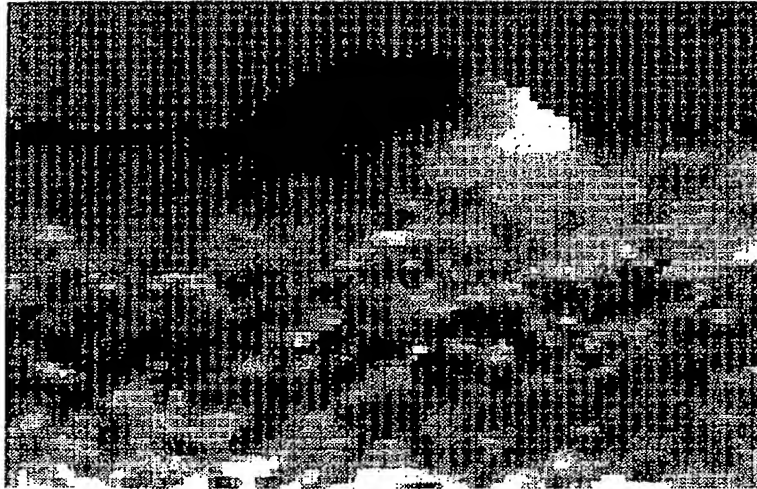
【図7】

図面代用写真



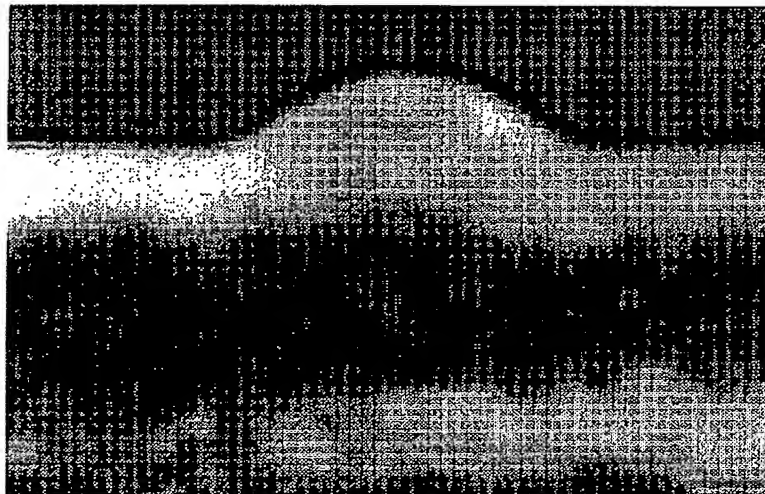
【図8】

図面代用写真



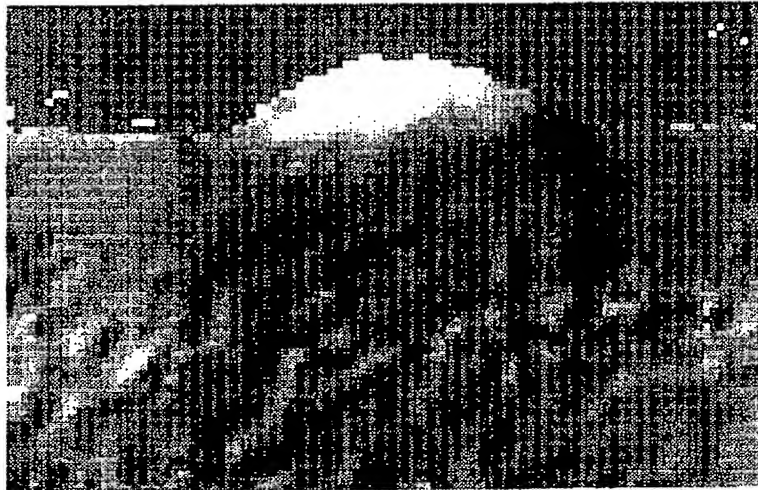
【図9】

図面代用写真



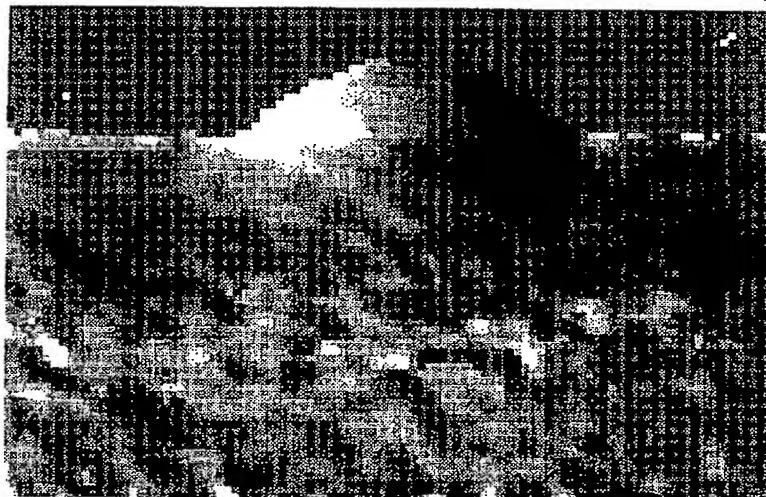
【図10】

図面代用写真



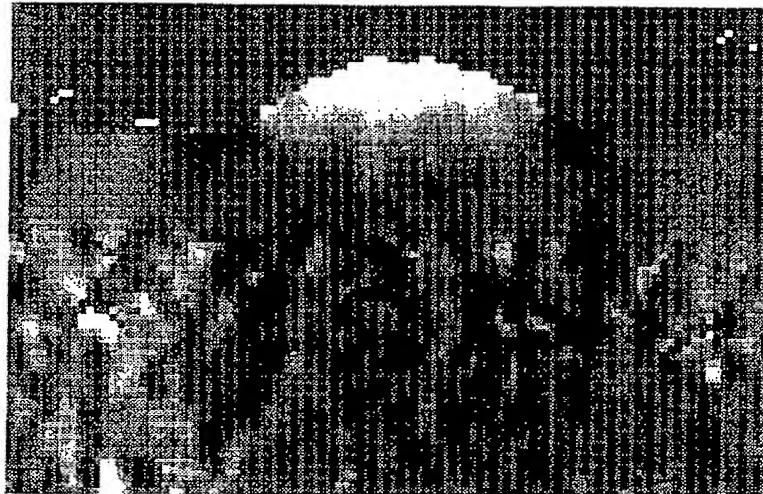
【図11】

図面代用写真



【図13】

図面代用写真



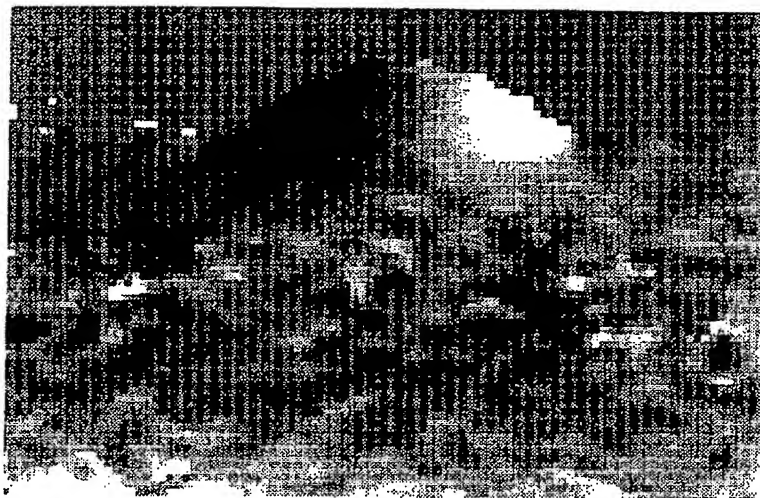
【図14】

図面代用写真



【図15】

図面代用写真



【図16】

図面代用写真



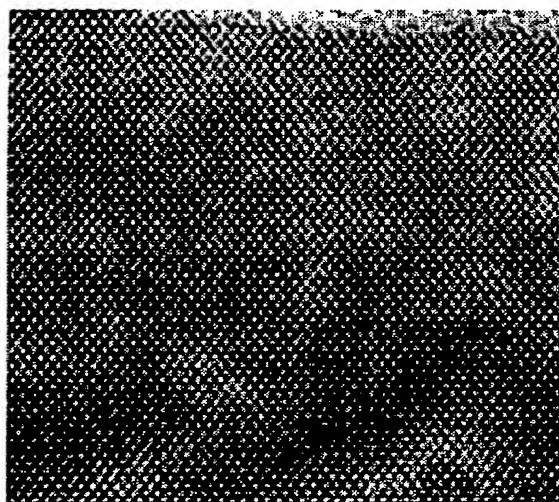
【図17】

図面代用写真



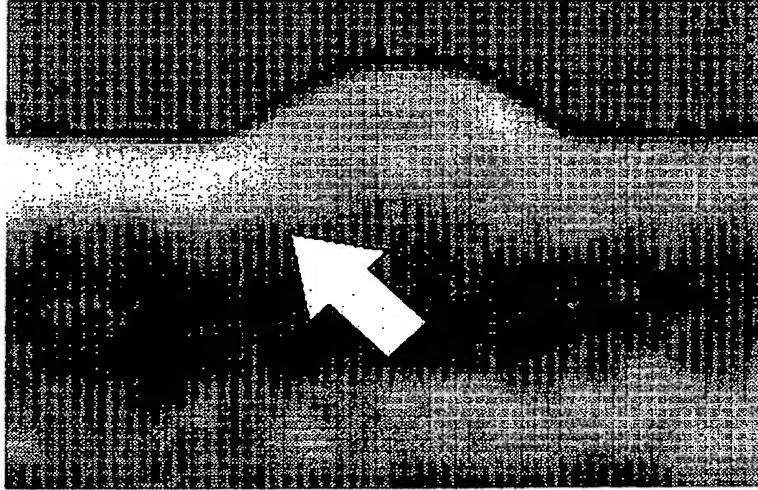
【図18】

図面代用写真



【図19】

図面代用写真



【図20】

図面代用写真



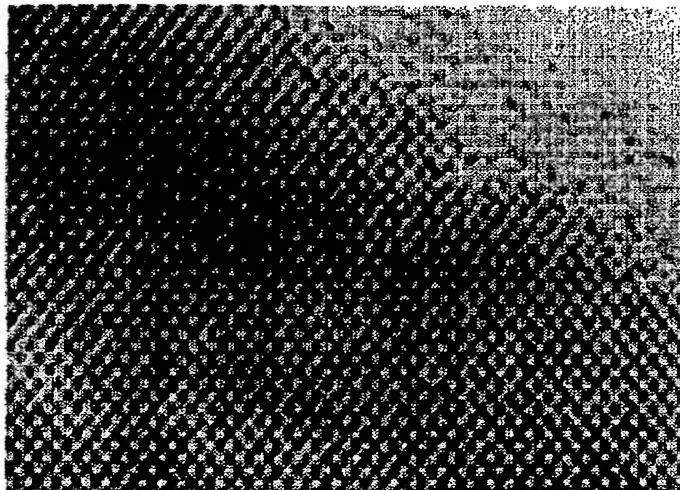
【図21】

図面代用写真



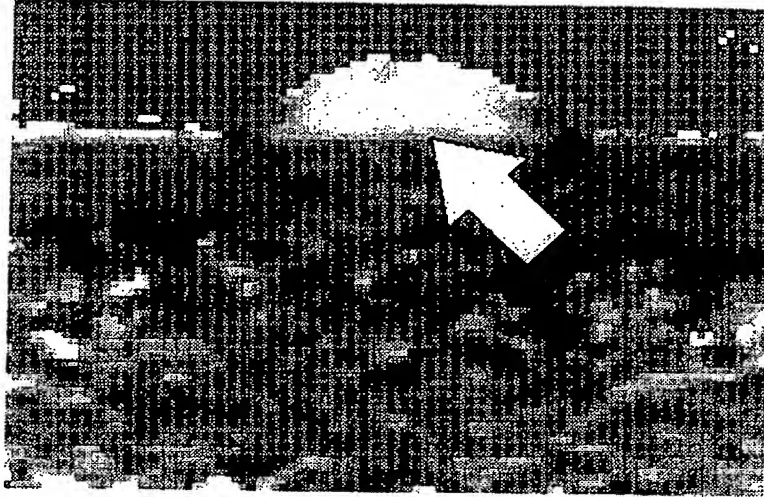
【図22】

図面代用写真



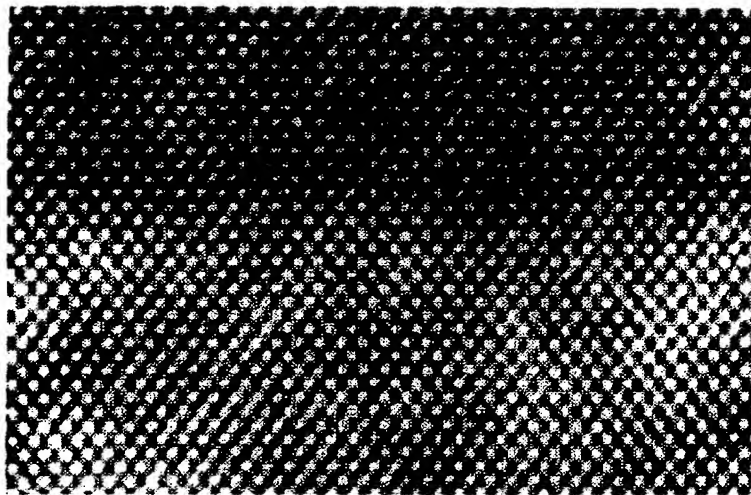
【図23】

図面代用写真



【図24】

図面代用写真



フロントページの続き

Fターム(参考) 2F067 AA45 AA65 BB00 HH06 JJ05
KK06 KK09 LL16 RR14
2G001 AA03 BA11 BA18 CA03 DA09
FA01 FA18 HA07 HA13 KA03
KA08 LA11
5B057 BA01 CG05 DA07 DA16 DB09
DC02 DC22